

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,  
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

**ФЕЕ :: 2013**

**МАТЕРІАЛИ  
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 22-27 квітня 2013 року)

Суми  
Сумський державний університет  
2013

## Трансформация энергии тонкопленочными металлическими наноструктурами. Молекулярно-динамическое моделирование

Коноваленко Ив.С., млад. науч. сотруд.;

Зольников К.П., *ведущ. науч. сотруд.;*

Коноваленко Иг.С., *млад. науч. сотруд.;* Псахье С.Г., *дир.*

ИФПМ СО РАН, г. Томск

Цель работы – компьютерное изучение структурных изменений на микроуровне в тонкопленочных металлических наноструктурах в процессе их формирования и при нагреве. Объект исследования – двухслойные тонкопленочные наноструктуры, слои которых состоят из атомов одного сорта (Al, Cu или Ni), формируемые самосворачиванием исходно напряженных пленок согласно [1]. Исследования проводились на основе подхода к моделированию процессов формирования наноструктур из многослойных кристаллических пленок [2]. Расчеты выполнялись в рамках метода молекулярной динамики. Межатомное взаимодействие рассчитывалось в рамках метода погруженного атома [3]. Показано, что при импульсном нагреве моделируемых наноструктур они начинают совершать механические колебания, обусловленные существенным различием коэффициентов теплового расширения слоев пленки и их температурных зависимостей. Исследованы особенности преобразования подведенной к наноструктурам тепловой энергии в механическую энергию колебаний их свободных краев, с учетом вязкостных характеристик окружающей среды, в которую они помещены. Изучены особенности структурных изменений на микроуровне в наноструктурах, ответственных за преобразование ими тепловой энергии в механическую. Выполнены оценки эффективности преобразования энергии двухслойными наноструктурами в зависимости от их конфигурации, размера и температуры нагрева.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-08-00817-а).

1. V. Ya. Prinz, D. Grutzmacher, et. al, *Nanotechnol.* **12**, 339 (2001).
2. Iv.S. Konovalenko, K.P. Zolnikov et. al, *Nanosyst.s: Phys. Chem. Math.* **2** No2, 76 (2011).
3. J. Cai, Y.Y. Ye, *Phys. Rev. B.* **54**, 8398 (1996).